

EL FULGOR DEL FUEGO Y LA CIENCIA DE LA COMBUSTION

Discurso leído por el Académico Correspondiente

Excmo. Sr. Dr. Amable Liñán Martínez

en el acto de su recepción el día 28 de abril de 1995

Excmo. Sr. Presidente de la Academia Canaria de Ciencias
Ilmos. Sres. Académicos, Señoras y Señores.

Debo empezar cumpliendo con la noble obligación de agradecer a la Academia Canaria de Ciencias la honrosa distinción que me otorga al acogerme en su seno. Yo, gustosamente, ofrezco mis servicios a la Comunidad Científica de Canarias para ayudar, en lo que me sea factible, al fortalecimiento de su actividad científica.

En esta sesión tan solemne para mí, hablaré de la Combustión o, en el lenguaje más popular, del fuego; ya que éste ha sido tema central, absorbente, de mi actividad.

Yo, humildemente, hago mías las bellísimas y profundas palabras de Borges en su "*Otro poema de los dones*"

*Gracias quiero dar al divino
laberinto de los efectos y de las causas...
por el fulgor del fuego
que ningún ser humano puede
mirar sin un asombro antiguo*

El asombro y la fascinación por el fuego ha acompañado siempre a los seres humanos. Asombrarse es empezar a entender, decía Ortega y Gasset recordando a Platón. Y Einstein decía que la más bella experiencia que podemos tener es lo misterioso; que esta emoción fundamental está en la cuna del verdadero arte y de la verdadera ciencia.

Como nos recordaba Forman Williams, en su conferencia plenaria en el XXIII Simposium Internacional de Combustión, las aportaciones del hombre a la combustión tienen ya medio millón de años de historia. Ocurrieron, según la mitología, después de que Prometeo robase el fuego a Zeus para traérselo a los hombres. Previamente Zeus, el dios de las tormentas y de los relámpagos y truenos, aterrizaba al hombre cada vez que un relámpago caía sobre un árbol y lo prendía en llamas. Nuestros antepasados huían asustados, perdiendo así la oportunidad de observar y experimentar con el fuego. Sólo Prometeo, hijo de uno de los Titanes, tuvo el coraje de tomar una rama ardiente y contribuir así a la técnica de la propagación del fuego. La propagación y mantenimiento del fuego, evitando su extinción, fué durante muchos años la preocupación principal del hombre en relación con la combustión.

Hace unos 30000 años que el hombre descubrió, posiblemente cuando estaba ocupado en la fabricación de herramientas de piedra, cómo iniciar el fuego mediante la transformación de

energía mecánica en térmica; así se anticipó a los experimentos del Conde Rumford de finales del siglo XVIII. Descubrió que al hacer agujeros en la piedra, o al trabajarla, podía iniciar la combustión; convirtiendo la energía mecánica en calor, si éste se localizaba en una pequeña cantidad de materia combustible. Así, ahora disponía de una fuente reproducible de ignición.

Los hombres aprendieron pronto a utilizar el fuego para calentar y para cocer y transformar los alimentos. El hombre descubrió que podía utilizar la radiación proporcionada por la combustión en la llama para disponer de luz, y así alumbrar su vivienda, utilizando antorchas y velas construidas rodeando mechas de material fibroso con grasa animal. También descubrió pronto cómo utilizar el fuego para la purificación y transformación de los metales. (Ya los egipcios, cuando se ocupaban en la construcción de sus monumentos y fabricación de los obeliscos, habían utilizado el fuego para calentar y después enfriar bruscamente las rocas con el objetivo de fragmentarlas).

La utilización de la combustión para producir energía mecánica es más reciente. Se inicia con su aplicación a las armas de fuego y, muy especialmente, con la invención de la máquina de vapor en el siglo XVIII.

Los conocimientos del hombre sobre el fuego y su utilización en tecnologías tan diversas son empíricos. Nacieron de la observación y de su preocupación práctica por su subsistencia y por la mejora de su calidad de vida; nacieron divorciados de la concepción que sobre el fuego tenían los seguidores de los pensadores griegos que se ocuparon de la Filosofía Natural.

Los griegos nos enseñaron a utilizar el pensamiento para tratar de comprender los fenómenos de la naturaleza, añadiendo a los puntos de vista religioso y poético un nuevo modo de entender nuestro mundo. Bachelard, en su libro *"El psicoanálisis del fuego"*, recoge los sueños poéticos que nos inspira la llama de la vela; pero nos advierte que *"para adquirir sabiduría el hombre debe renunciar a todas las visiones que percibe en la caprichosa fantasmagoría de la llama danzante y ligera"*. Borges nos dice que: *"Pensar es olvidar diferencias, es generalizar, es abstraer, es nombrar, describir, definir"*. Si esto es útil y posible es porque existe un orden armonioso en los fenómenos de la naturaleza, recogido parcialmente en las palabras con que nos comunicamos.

Nos dice el diccionario de nuestra Academia de la Lengua que la **ciencia** es el conjunto de conocimientos poseídos por la Humanidad acerca del mundo físico y del espiritual, de sus leyes y de su aplicación a la actividad humana para el mejoramiento de la vida. Y que también se dice del conjunto de conocimientos que alguien tiene adquiridos por el estudio, la investigación o por la meditación. Investigar es, según el diccionario, hacer gestiones o diligencias para llegar a saber ciertas cosas.

Nuestros conocimientos del fuego y de los procesos de combustión, resultantes de las investigaciones de nuestros antepasados y de nuestros contemporáneos, están razonablemente bien resumidas en nuestro lenguaje. Así, por ejemplo, el diccionario define el **fuego** como "combustión que se manifiesta con desprendimiento de luz, calor intenso y frecuentemente **llama**"

y define ésta, como: "Masa gaseosa en combustión, que se eleva de los cuerpos que arden, y despiden luz de vario color". Y también, como: "Eficacia y fuerza de una pasión o deseo vehemente" (Octavio Paz, en *La llama doble*, nos habla de la llama roja del erotismo y de la llama azul y trémula del amor).

De la palabra **combustión** el diccionario da una primera definición: "Acción o efecto de arder o quemar", apoyándose en conceptos que parecen próximos a nuestra experiencia directa. Pero da también una definición de carácter más científico: "Combustión es la combinación de un cuerpo combustible con otro comburente, especialmente el oxígeno del aire, con desprendimiento de luz y calor". En esta definición, debida a Lavoisier, intervienen un conjunto de palabras o conceptos más alejados de nuestra experiencia directa que, sin embargo, son esenciales para nuestra comprensión profunda del fuego y de los procesos de combustión.

El modelo teórico de la naturaleza que prevaleció hasta el siglo XVIII se heredó de Empédocles y de Aristóteles. Empédocles propuso que todas las sustancias de la naturaleza se basaban en cuatro elementos: Tierra, agua, aire y fuego. Aristóteles añadió, a estos cuatro elementos, la quintaesencia, que situó en los cielos. Así pues, para los griegos el fuego era un elemento; para los alquimistas éste era el elemento transformador de unas sustancias en otras.

Aunque ya los griegos hablaron de una propiedad asociada al fuego que poseían algunas sustancias: "el principio inflamable", éste fue finalmente, en el siglo XVIII, materializado por Stahl en el flogisto. Ésta era una sustancia que contenían los cuerpos inflamables, que se desprendía al arder. El aire recogía esta sustancia, flogistizándose hasta un nivel de saturación completa; de manera que las sustancias flogistizadas no podían arder en aire flogistizado. Las plantas absorbían el flogisto del aire, deflogistizándolo, y se convertían en combustibles; la respiración aportaba el aire necesario para recoger el flogisto que se producía en nuestro interior con la transformación de los alimentos.

Si bien la teoría del flogisto explicaba una fracción importante de los fenómenos de combustión conocidos, conducía a contradicciones insalvables con las incipientes observaciones experimentales que se estaban llevando a cabo. Así por ejemplo, Sir Francis Bacon señaló en 1620 la existencia de una estructura compleja en las velas. Otto von Guericke inventó una bomba para hacer vacío; y observó que una vela dejaba de arder en el interior de un recipiente cuando éste se vaciaba. Robert Hooke anticipó la idea de que el aire tenía un componente activo que se combinaba con las sustancias combustibles al calentarlas para dar lugar a la llama; e incluso adscribía la alta temperatura de la llama al movimiento rápido de las partículas de aire.

La naturaleza verdadera de la combustión fue puesta de manifiesto en torno al año 1775 por Antoine Laurent Lavoisier, quien demostró, mediante experimentos cuidadosos, que al arder en el aire el fósforo o el azufre perdían el peso, que ganaban los calces u óxidos formados; y que esto mismo ocurría también en la oxidación de los metales. Demostró que sólo una quinta parte del aire original intervenía en la combustión; el resto era aire irrespirable. Más tarde mostró que el aire que se había combinado con el azufre era el mismo, encontrado poco antes

por Priestley, que se desprendía al calentar las cenizas metálicas de mercurio. Lavoisier dió a este gas el nombre de oxígeno (dador de vida, por ser imprescindible para la misma).

Así pues Lavoisier nos enseñó que la combustión es una combinación, o reacción química, del oxígeno del aire con las sustancias combustibles; sin cambio de peso y con desprendimiento de calor. (Supuso que el calor sería una sustancia imponderable, que llamó el calórico).

El aire no era uno de los elementos básicos de la naturaleza; estaba compuesto de al menos dos sustancias elementales: una el oxígeno, que sí era un elemento. Más tarde mostró que el hidrógeno (al que dió el nombre actual), era otro de los elementos, que combinado con el oxígeno daba lugar al agua. El agua dejaba así de ser un elemento al igual que el fuego y el aire. También mostró que era posible descomponer el agua en sus elementos, hidrógeno y oxígeno, y con todo esto inició la Química moderna.

Se debe a Galileo la invención del termómetro (basado en la expansión del aire contenido en un recipiente); pero se debe a Lavoisier, en colaboración con Laplace, la introducción de la calorimetría. Observaron, como previamente lo había hecho el escocés Black, que la fusión del hielo se producía, sin cambio de temperatura, por aportación de calor; el calor producido en la combustión podía medirse como consecuencia de la cantidad de hielo fundido.

Acaba de cumplirse el bicentenario de la muerte en la guillotina de Lavoisier, a quien con toda razón consideramos el iniciador de la Química moderna y, por supuesto, de la Teoría de la Combustión. Es justo que hayamos dedicado estos minutos a recordar su obra, y que recordamos ahora las palabras de homenaje de Lagrange, el gran matemático francés nacido en Italia, quién después de la muerte de Lavoisier se lamentó de que: *Sólo se necesitó un momento para separar del cuerpo su cabeza y quizás no baste un siglo para crear otra igual*".

Nuestro conocimiento científico, más profundo, de los procesos de combustión sólo ha sido posible después del desarrollo de las ciencias básicas; como la Física, Química, Mecánica de Fluidos y Matemáticas imprescindibles para ese conocimiento. El carácter multidisciplinar de la ciencia de la Combustión era muy patente para Faraday quién, sobre el tema *La Historia de la Química*, dió dos veces las Christmass Lectures, que la Royal Institution de Londres sigue ofreciendo a los muchachos (de doce años) más brillantes de la ciudad para inculcarles la vocación científica. La Royal Institution fué creada en 1799 por el Conde Rumford; dejando, en 1802 (cuando fué a casarse con la viuda de Lavoisier), el puesto de director a Sir Humphrey Davy. Éste fué descubridor, entre otras cosas, del sodio, potasio, calcio, bario, estroncio y magnesio y también de la lámpara que detectaba el grisú en las minas. Faraday substituyó en 1820 a Davy como Director de la Royal Institución, después de haber sido contratado (en 1812,) como ayudante de Laboratorio por Davy. (Impresionado por las notas que había tomado, de sus conferencias sobre química, el aquel entonces adolescente aprendiz de encuadernador de libros).

Faraday "reclamó para sí, sintiéndose de espíritu juvenil, el privilegio de la utilización varias veces de las Conferencias de Navidad, para hablar a los niños". Les ofreció dos veces el

tema de las velas, "pues le parecía tan atractivo y tan maravillosa la variedad de perspectivas que ofrecía a los diversos departamentos de la filosofía natural. No había ley que rija a este universo que no juegue un papel en los fenómenos de la vela. No había una puerta mejor para acceder al estudio de la filosofía natural que la consideración de los fenómenos físicos de la vela". Un libro, con el título de las conferencias, fué publicado en 1860 por Faraday; reúne lo expuesto en las mismas, y con ello el estado del arte de los conocimientos físico-químico tan variados necesarios para entender el funcionamiento de la vela.

Así sabemos ahora que, si no se hace la ignición, la vela permanece intacta durante años, aunque sus componentes son más inestables que los productos de su combustión con el aire. Las moléculas de la cera, de 18 a 20 átomos de carbono, con dos de hidrógeno cada uno, tienen una estructura tridimensional con las moléculas en perpétua agitación térmica que crece con la temperatura. Los átomos están unidos por enlaces covalentes, compartiendo un par de electrones.

Al acercar una cerilla ardiendo aumenta la temperatura de la cera hasta que se produce la fusión a 400°C. El líquido forma una charquita bordeada por cera, que está sin fundir gracias a la refrigeración por la corriente de aire ascendente; esta corriente es inducida en la llama por las fuerzas de flotabilidad (en realidad gravitatorias). El líquido asciende, por capilaridad, en la mecha. El calor que llega, por radiación y conducción, desde la llama a la mecha se necesita para la gasificación del líquido combustible. Los gases generados viajan por convección y difusión para encontrarse con el oxígeno del aire. Entonces reaccionan formando una gran cantidad de especies intermedias (y hollín ó carbonilla); liberando energía térmica que se transporta por radiación y conducción de calor, asistida por el movimiento convectivo inducido por las fuerzas gravitatorias.

Así pues, la combustión, como nos enseñó Lavoisier, es una reacción química entre una sustancia combustible (reductora) y un comburente, frecuentemente el oxígeno del aire. El combustible puede ser sólido, como el carbón, o líquido o gaseoso, como son los hidrocarburos. La reacción química tiene lugar, generalmente, en fase gaseosa después de la gasificación del combustible y mezcla con el aire. En la zona de reacción, en forma de llama, se genera calor y frecuentemente luz. El calor generado por la reacción química se acumula localmente en la zona de reacción y también puede transmitirse a las zonas circundantes por radiación y conducción reforzada por la convección. El incremento local de temperatura acelera allí el ritmo de reacción, que es muy sensible con la temperatura, por lo que la reacción puede tomar un carácter explosivo. La concentración de los reactantes se hace pronto pequeña donde se produce la reacción, por lo que éstos deben ser transportados por difusión a la zona de reacción. La reacción se detiene cuando se alcanza el equilibrio químico entre reactantes y productos y esto implica, frecuentemente, el agotamiento de uno de los reactantes.

La emisión de luz, o energía radiante, se produce como consecuencia de la aparición de moléculas o átomos con niveles electrónicos excitados, o de partículas sólidas producidas en el curso de la reacción química y evolución posterior de los productos.

Las aplicaciones de la combustión se derivan del carácter exotérmico de estas reacciones químicas y de la radiación luminosa emitida. Como decíamos antes, desde hace medio millón de años el hombre ha utilizado la combustión para alumbrarnos y para calentarnos y calentar y cocer los alimentos. Pero el calentamiento, asociado a la reacción, de la mezcla reactante y de los productos de la combustión va acompañado por incrementos de presión y expansión de los gases de combustión; de ahí la posibilidad de producir trabajo con ayuda de los gases de combustión. Esta posibilidad se ha aprovechado en las máquinas de vapor, los motores alternativos (de encendido por chispa y Diesel), los turbo-reactores, motores cohete y turbinas de gas; máquinas estas que han cambiado radicalmente nuestro modo de vida.

Quemamos anualmente 5000 millones de toneladas de hidrocarburos y otras 2000 millones de toneladas de carbón. Al ritmo de consumo actual acabaremos, en menos de un siglo, con los hidrocarburos líquidos o gaseosos existentes, que han tardado en formarse cientos de millones de años. Este consumo se hace, fundamentalmente por los países ricos, con rendimientos muy escasos; típicamente, sólo del orden del 25 por ciento de la energía química se aprovecha como energía mecánica. Pero, por otra parte, los productos de la combustión, esencialmente vapor de agua y dióxido de carbono, van acompañados por sustancias contaminantes (como hidrocarburos sin quemar y óxidos de nitrógeno y azufre) que, aunque emitidos en proporciones mil veces más pequeñas, son dañinos para la salud de las plantas y animales.

De ahí que la tarea de aumentar el rendimiento de los sistemas de conversión de energía y propulsión (basados en la combustión) sea una tarea de extraordinaria importancia económica. Pero este aumento del rendimiento debe hacerse, si tenemos en cuenta el enorme impacto ambiental que tienen los sistemas de combustión, atenuando simultáneamente la emisión de contaminantes. La preocupación creciente de la sociedad por el medio ambiente nos obligará a rediseñar los sistemas de combustión actuales.

En los sistemas de combustión intervienen una gran variedad de procesos y mecanismos físicos. Decíamos que la combustión, o reacción del combustible con el oxígeno del aire, ocurre en fase gaseosa en la mayoría de las aplicaciones. Por ello, por ejemplo, antes de introducir el carbón en las cámaras de combustión de las centrales térmicas, éste se tritura y pulveriza para facilitar su gasificación. Las partículas de carbón, con tamaños inferiores a las 100 micras, son arrastradas por una corriente de aire para alimentar la cámara de combustión, mediante un sistema de inyectores. Cada uno de éstos genera un chorro central, de aire primario con partículas de carbón, y un chorro coaxial de aire secundario. El comportamiento de la caldera está determinado por la interacción de estos chorros entre ellos y con los productos de la combustión.

De modo análogo, en las cámaras de combustión de los motores Diesel y de los motores de reacción y cohete, el combustible se inyecta en la cámara en forma de chorros líquidos que, como consecuencia de una variedad de inestabilidades hidrodinámicas, se atomizan para formar con el aire chorros multifásicos, en forma de neblinas formadas por gotas líquidas y aire. En este proceso de atomización son determinantes las fuerzas de tensión superficial y las fuerzas aerodinámicas

sobre el chorro. (Para valores altos de la presión de inyección se produce cavitación en el interior del inyector y ésta afecta de modo esencial a la atomización posterior).

Para aumentar la eficacia de los sistemas de combustión es imprescindible conocer los mecanismos responsables de las inestabilidades que facilitan la atomización y mezcla con el aire de estos chorros de combustible, y disponer también de métodos de cálculo, no demasiado costosos, para analizar la dinámica de estos chorros.

Las reacciones químicas que encontramos en la combustión son resultado de las colisiones "inelásticas" entre las moléculas de los reactantes, por lo que éstos han de mezclarse íntimamente antes de la reacción, mediante el mecanismo de la difusión intensificado por la convección. La energía térmica generada por la reacción es transportada por convección, conducción y radiación desde la zona de reacción al resto del fluido.

Como pueden ver, el análisis de los procesos de combustión es de carácter multidisciplinar, no pudiendo hacerse sin el auxilio de la Termodinámica, la Cinética Química y la teoría que describe los fenómenos de transporte de calor y masa en el marco de la Mecánica de Fluidos. Puesto que estas últimas teorías sólo han tenido un desarrollo adecuado en este siglo, la Teoría de la Combustión tampoco ha podido desarrollarse antes, como disciplina científica de carácter aplicado.

A pesar de ello, los conocimientos empíricos que tiene el hombre sobre la combustión se remontan a medio millón de años en la Historia; el uso por el hombre de la combustión para calentarse y cocinar los alimentos precede a la historia escrita. El desarrollo de hornos y hogares es más reciente, pero de origen oscuro, como lo es el de las armas de fuego y cohetes pirotécnicos. Las aplicaciones de la combustión jugaron un papel determinante en la revolución industrial. Cuando Otto construyó su motor de combustión interna en 1876 no se conocían los principios de la propagación de llamas. Los conocimientos teóricos no fueron imprescindibles tampoco para el desarrollo inicial del motor Diesel en 1892. Los desarrollos iniciales de las turbinas de gas, motores de reacción y motores cohete se hicieron también de un modo semi-empírico.

Sin embargo, el conocimiento de los procesos de combustión es esencial para un diseño adecuado de todos estos sistemas; y éste es ineludible, dado el enorme impacto económico y ambiental de los mismos. Aunque nuestro conocimiento de los procesos de combustión estuvo limitado hasta 1950 por la falta de una formulación general de los mismos, y de las herramientas para la solución de las ecuaciones, ésto no impidió el desarrollo de muchos de los conceptos e ideas imprescindibles para su descripción. Nuestro conocimiento de los mismos se encuentra en un periodo de crecimiento espectacular por varios motivos:

En primer lugar, los progresos recientes en técnicas de diagnóstico de tipo Láser han venido a revolucionar tanto los procedimientos de visualización como los de velocimetría y medición de concentraciones y temperaturas. En segundo lugar, es difícil comprender cómo podría analizarse la ingente masa de datos experimentales que proporcionan estos sistemas, si no se dispusiese de

los potentes ordenadores actuales para el tratamiento e interpretación de los datos, una vez digitalizados. Y, en tercer lugar, este tratamiento puede hacerse eficazmente porque, paralelamente, se han desarrollado y se están desarrollando las técnicas analíticas que permiten reconocer las estructuras que caracterizan el proceso; este desarrollo viene facilitado, de nuevo, por las enormes posibilidades que ofrecen los ordenadores para la simulación numérica.

El análisis de los procesos de combustión puede hacerse en el marco de la Dinámica de Fluidos, como medios continuos; porque, en la mayoría de las aplicaciones, el tiempo característico entre colisiones elásticas de una molécula es pequeño frente al tiempo característico del movimiento y también frente al tiempo entre las colisiones inelásticas responsables de las reacciones químicas. Las colisiones llevan al fluido a un estado muy próximo al de equilibrio termodinámico local, correspondiente a mezclas no reactivas, caracterizado por un número reducido de magnitudes fluidas. Los efectos de las reacciones químicas darán lugar a un desplazamiento lento de este equilibrio termodinámico local, que puede conducir o no al equilibrio químico, dependiendo del valor de la relación entre el tiempo característico mecánico del movimiento y el tiempo característico de las reacciones químicas. En el límite continuo, el estado del fluido está bien descrito por el campo de velocidades, energía interna específica, y densidad de cada una de las especies moleculares que componen la mezcla reactiva. Es de esperar que estas magnitudes sean funciones de las coordenadas espaciales y del tiempo, con derivadas espaciales de todos los órdenes, continuas en cada fase fluida.

Las ecuaciones que permiten calcular la evolución temporal y dependencia espacial de estas magnitudes son las leyes de conservación de la masa para cada una de las especies, de la cantidad de movimiento y de la energía. Por no existir equilibrio termodinámico global ni equilibrio químico local, deben incluirse las contribuciones de las reacciones químicas y de la difusión en las ecuaciones de conservación de la masa de cada una de las componentes; así mismo, han de incluirse los esfuerzos viscosos y los flujos de calor en las ecuaciones de la cantidad de movimiento y energía. También hemos de añadir, para completar el sistema de ecuaciones, las expresiones que, en función del estado termodinámico local, nos proporciona la Cinética Química para la tasa de producción másica de cada especie debida a las reacciones químicas.

Las principales dificultades del análisis teórico de los procesos de combustión están ligadas, en primer lugar, a nuestro conocimiento parcial de la cinética de las reacciones químicas, tanto de los mecanismos o reacciones elementales involucradas como de los valores de las constantes de reacción; en segundo lugar, al carácter tan complejo y no lineal del sistema de ecuaciones de conservación que describen los procesos; y, por último, al carácter turbulento de los flujos que encontramos en estos sistemas de combustión.

Lo que distingue a unos flujos de otros son las condiciones iniciales y de contorno; de estas condiciones podemos extraer las escalas básicas del flujo. Los parámetros adimensionales formados con estas escalas son los que determinan la estructura del flujo. La igualdad de los parámetros adimensionales en dos flujos se traduce en su semejanza dinámica, que es la base de

la experimentación con modelos.

Los parámetros adimensionales miden la importancia relativa de los distintos términos o mecanismos físicos en las ecuaciones y frecuentemente toman valores grandes o pequeños frente a la unidad; de ahí la conveniencia del análisis asintótico que permita simplificar la descripción del flujo.

El número de Damköhler es la relación entre el tiempo mecánico y el tiempo químico; cuando es muy pequeño frente a la unidad, los reactantes evolucionan y se mezclan como si la reacción química estuviese congelada. En el caso opuesto de valores grandes del número de Damköhler, el flujo no presenta desviaciones significativas del equilibrio químico local.

Cuando en un proceso de mezcla y combustión las reacciones químicas pueden modelarse mediante una reacción global irreversible entre el combustible y el oxidante, con una velocidad de reacción tan alta que el número de Damköhler es grande frente a la unidad, es posible hacer una descripción asintótica del proceso, considerando la reacción química infinitamente rápida como primera aproximación. Burke y Schumann introdujeron en 1928 esta descripción asintótica para el análisis de los sistemas de combustión en los que los reactantes no están inicialmente mezclados. Comprendieron que en el caso límite de reacción química infinitamente rápida el combustible y el oxidante no pueden coexistir en el campo fluido; éstos aparecen separados por una capa de reacción infinitamente delgada o superficie de llama. A ésta llegan los reactantes, en proporciones estequiométricas, transportados por difusión a través de los productos, desde ambos lados de la superficie de reacción. El calor liberado por la combustión en la superficie de llama es transportado por conducción a ambos lados de la misma.

El problema de la descripción de las llamas controladas por la difusión es, por lo tanto, un problema fluidodinámico en el que juegan un papel esencial los fenómenos de transporte de calor y masa. En el problema matemático resultante aparece la posición de la superficie de llama como incógnita, al igual que la intensidad de los sumideros de reactantes y fuentes de calor y productos que, estando localizados en la superficie, son proporcionales a la masa de combustible consumida por unidad de superficie y tiempo en la llama.

Mi primera tarea de investigación consistió en examinar el papel de la cinética de la reacción en la estructura de las llamas de difusión, con el objetivo de encontrar el criterio para asegurar la validez del método de Burke-Schumann, que se basa en la hipótesis de reacción química infinitamente rápida. Para ello busqué una descripción asintótica de la estructura de las llamas de difusión para valores altos del número de Damköhler; adaptando a este problema las ideas introducidas por Prandtl en su Teoría de la Capa Límite. Cuando el tiempo químico es pequeño frente al tiempo de mezcla, el campo fluido aparece dividido en dos regiones: Una exterior, donde el flujo aparece bien descrito por el análisis de Burke y Schumann, y otra interior, en forma de capa delgada de reacción en torno a la superficie de llama. En esta capa los efectos de la reacción química aparecen compensados por la difusión de masa y calor en la dirección normal a la llama.

Así pues, el análisis asintótico, que reconoce la disparidad de las escalas de las dos regiones, conduce a una simplificación notable de las ecuaciones de partida, diferente para las dos regiones. La solución del problema interno nos describe la estructura de la capa de reacción; es decir, la forma en que se produce la interdifusión entre los reactantes y cómo se elimina por conducción el calor generado.

El método utilizado en nuestro análisis de la estructura interna de las llamas de difusión fué resultado, como decía antes, de la adaptación al problema de las ideas de la Teoría de la Capa Límite. A mediados de los años 50, Kaplun, Lagerstrom y Cole, en el Caltech, generalizaron el método de la capa límite para tratar, mediante técnicas de perturbaciones de tipo formal, una variedad muy amplia de problemas de perturbaciones singulares. El método de los desarrollos asintóticos acoplados arranca del convencimiento de que es posible y conveniente dividir el dominio físico espacial en regiones y el temporal en etapas para simplificar el análisis, de modo diferente en cada una de ellas.

Debo advertir que existen otras muchas técnicas asintóticas para tratar problemas de perturbaciones: entre ellas, las técnicas de escalas múltiples para los problemas de tipo oscilatorio, cuya amplitud o fase son lentamente variables. Estos métodos de escalas múltiples han encontrado una aplicación muy importante en el desarrollo de las técnicas de homogeneización. Con estas técnicas se busca obtener las leyes constitutivas macroscópicas, a las que responden los medios microscópicamente heterogéneos. La técnica tiene muchos campos de aplicación entre los que citaré: el comportamiento elástico de materiales compuestos o policristalinos, el flujo a través de medios porosos y el análisis de flujos multifásicos.

En la caracterización de los procesos de combustión intervienen otros parámetros importantes: Uno es el factor por el que hay que multiplicar la temperatura inicial para obtener la temperatura de la llama. Otro es el número de Zel'dovich, o valor adimensional de la energía de activación de la reacción; éste es el cociente entre el incremento de temperatura esperado y el incremento de temperatura necesario para multiplicar por un factor e la velocidad de reacción. Por las aportaciones tan importantes del gran científico ruso Zel'dovich, éste es considerado como el padre de la moderna Teoría de la Combustión.

Muchos de los conceptos introducidos para la descripción de los procesos de combustión (como son los de ignición, extinción, explosiones térmicas, junto al de ondas de detonación y deflagración) están asociados al hecho de que la reacción es exotérmica y su energía de activación es alta. En este caso, cuando observamos los flujos gaseosos reactivos en los que el combustible y el oxidante, no estando inicialmente mezclados, siguen una reacción exotérmica, de energía de activación alta frente a la térmica, encontramos que: Por ser las reacciones exotérmicas, hay grandes diferencias de temperatura en el campo fluido. Por ser la reacción química tan sensible a la temperatura, el tiempo químico es muy grande frente al tiempo de residencia en las regiones donde la temperatura es baja; ocurriendo lo contrario en las zonas de temperatura alta. Así pues, la reacción química está congelada en las zonas frías y hay equilibrio químico donde la

temperatura es alta.

El equilibrio químico implica que uno u otro de los reactantes tiene concentración nula, puesto que ha sido previamente consumido por la reacción química. Esta ha tenido (o está teniendo) lugar en capas delgadas de reacción en forma de *llamas premezcladas* ricas o pobres, cuando separan zonas de flujo congelado de zonas de equilibrio químico (sin oxidante o sin combustible). La reacción tiene lugar en las capas delgadas que designamos como *llamas de difusión*, cuando separan una zona de equilibrio sin oxidante de una zona de equilibrio sin combustible. La estructura de las capas de reacción, está determinada por el balance entre la conducción o difusión normal a la llama y la producción química.

El número de Reynolds es el parámetro más importante de la Mecánica de Fluidos y también, sin duda, de la teoría que se ocupa de los procesos de combustión. Puede interpretarse como el cuadrado de la relación entre el tamaño del campo fluido y la distancia alcanzada por los efectos de la difusión durante el tiempo de residencia de las partículas fluidas en el mismo.

Los flujos que encontramos en la mayor parte de los sistemas de combustión, son flujos a altos números de Reynolds. La razón, está en que, como veremos, con este tipo de flujos se consigue intensificar la velocidad de combustión al intensificar el proceso de mezcla que controla esta velocidad. Puesto que en los movimientos a altos números de Reynolds, los términos que representan el transporte difusivo aparecen como poco importantes frente a los términos del transporte convectivo, parece razonable despreciar los efectos viscosos y de la difusión masica y térmica en las ecuaciones de conservación: lo que conduce a las ecuaciones de Euler del movimiento de los fluidos ideales.

Como una primera consecuencia importante de haber eliminado el mecanismo de difusión molecular en estas ecuaciones, encontramos que las partículas fluidas mantienen su composición al pasar a través del campo fluido. Así pues, si los reactantes no están mezclados inicialmente, aparentemente no tendrían tiempo para mezclarse a su paso por la cámara y no habría posibilidad de reacción química entre ellos. Si queremos que las soluciones de las ecuaciones de Euler representen bien los flujos reales, debemos renunciar a la exigencia de continuidad de las magnitudes fluidas y sus derivadas. De ahí la necesidad de incorporar superficies de discontinuidad de la velocidad, presión, temperatura y composición en el seno del campo fluido. Por otra parte, debemos permitir el deslizamiento del fluido ideal respecto a los sólidos que lo limitan, con una temperatura que no tiene por qué coincidir con la del sólido.

Los efectos viscosos y de la difusividad térmica y másica se encargan, como es natural, de suavizar estas discontinuidades y de adaptar el estado del fluido al de la pared. Así, al considerar que los números de Reynolds son grandes pero finitos las superficies de discontinuidad se convierten en capas de transición y de mezcla, de espesor pequeño pero no nulo; por otra parte, el movimiento deslizante en torno a la pared ocurre en una capa límite, térmica y viscosa, también de espesor no nulo.

Se debe a Helmholtz la introducción, en 1868, de las discontinuidades tangenciales en la descripción de los movimientos de los fluidos ideales, con el objetivo de que ésta descripción respondiese más adecuadamente a los flujos reales. Las discontinuidades reciben el nombre de tangenciales porque el movimiento relativo del fluido a la superficie es tangencial a la misma, con velocidades, temperatura y concentraciones distintas a cada lado. Estas superficies de discontinuidad tangencial arrancan de la superficie de los cuerpos que limitan al fluido, como consecuencia del desprendimiento de la capa límite.

Para poner un ejemplo simple, de interés en los sistemas de combustión, imaginemos cómo es el proceso de descarga a la atmósfera de un combustible gaseoso a través de una tobera o inyector. En el movimiento resultante, los efectos viscosos están confinados a una capa límite delgada, que abandona la superficie del inyector para formar la capa de torbellinos que separa el chorro de combustible del aire. Idealmente, en ausencia de fenómenos viscosos y de difusión, el chorro mantendría indefinidamente, sin mezclarse con el aire, su espesor y velocidad. La razón por la que esto no ocurre se conoce desde 1871; cuando Lord Kelvin, al analizar la estabilidad de las capas de torbellinos, supuestas infinitamente delgadas, mostró que cualquier ondulación de la superficie de discontinuidad viajaba aguas abajo con la velocidad media y crecía a un ritmo inversamente proporcional a la longitud de onda de la perturbación.

Así pues, las capas de torbellinos son siempre inestables como consecuencia de este mecanismo de inestabilidad. Lord Rayleigh mostró más tarde que el ritmo de crecimiento de las perturbaciones es máximo para aquellas cuya longitud de onda es del orden del espesor de la capa. Los efectos viscosos son los que determinan el valor inicial de este espesor, pero tienen poca influencia en la evolución de las perturbaciones.

Los análisis experimentales y numéricos de la evolución de la capa de torbellinos y de mezcla entre dos corrientes paralelas, separadas aguas arriba por una placa, muestra que las perturbaciones de tipo bidimensional, con longitud de onda comparable al espesor inicial de la capa, crecen en amplitud, concentrándose la vorticidad en torbellinos de eje perpendicular a la dirección del flujo.

La existencia de grandes torbellinos en las capas de mezcla turbulentas, en forma de estructuras coherentes, fué descubierta en 1971 en el Caltech por Brown y Roshko. Éstos montaron una instalación en la que se generaban dos corrientes paralelas de nitrógeno y helio, con el objetivo de simular el proceso, de aplicación a la combustión supersónica, de mezcla turbulenta de chorros de hidrógeno en aire. La gran diferencia de densidades permitía, utilizando técnicas de umbrioscopia o estrioscopia, visualizar el flujo (sin necesidad de sembrarlo con partículas) y tomar películas del mismo a un ritmo de 8000 imágenes por segundo.

Los resultados fueron sorprendentes; mostraban grandes torbellinos con una estructura coherente, casi determinista, que crecían por apareamiento, dando a la capa de mezcla una anchura que variaba linealmente con la distancia a la placa. El carácter caótico del flujo se debía fundamentalmente al carácter caótico de la fase de los torbellinos a su paso por cada

punto y del momento en que se producía el apareamiento. Una sonda aspirante con entrada sónica, con un hilo caliente en su interior, desarrollada por el Ingeniero Aeronáutico español Manuel Rebollo en colaboración con Brown, permitía medir las fluctuaciones de concentración en la capa de mezcla con una resolución espacial de 0.1 mm y resolución temporal en el rango de los KHz. Las fuertes oscilaciones de la concentración local mostraban que sólo había mezcla macroscópica pero no microscópica, lo que explicaba la poca eficiencia del proceso de combustión supersónica del hidrógeno en aire.

Conviene observar que la evolución bidimensional de la capa de mezcla, que describen las simulaciones numéricas, adquiere pronto un carácter caótico (en el sentido del caos determinista de los sistemas dinámicos), caracterizado por una gran sensibilidad de los detalles del flujo ante pequeñas perturbaciones en las condiciones iniciales. Este carácter caótico, típico de los movimientos turbulentos, se acentúa cuando se incluyen perturbaciones en la dirección de la envergadura; éstas producen las ondulaciones de los torbellinos bidimensionales, generándose un sistema de torbellinos contrarrotatorios alineados con el flujo, que juegan un papel muy importante en el proceso de mezcla.

Las capas de mezcla están fuertemente distorsionadas por el flujo turbulento resultante, acelerando muy fuertemente la mezcla entre los reactantes. Encontramos dos cascadas en la evolución de los torbellinos: Una cascada directa, de Kolmogorov, de generación de torbellinos de escalas más y más pequeñas por inestabilidades de los torbellinos grandes y, también, una cascada inversa, representada por el proceso de apareamiento de los torbellinos. Esta última determina el crecimiento aparente de la capa de mezcla, reduciendo considerablemente la longitud del chorro y facilitando la mezcla macroscópica de los reactantes; la cascada directa es la que facilita la mezcla a escala molecular.

En resumen, podemos decir que la mezcla a escala molecular, necesaria para las reacciones químicas, está ligada a la difusión. Esta mezcla es acelerada por el proceso de agitación turbulenta y sólo puede tener lugar después de la ingestión de fluido (externo), no rotacional, por las escalas grandes del flujo. El fluido ingerido es digerido por el proceso de generación de escalas pequeñas a partir de las escalas grandes, hasta llegar a la escala de Kolmogorov donde entra en juego la difusión molecular. En todo caso, este proceso de generación de escalas más y más pequeñas, aunque determinado por el ritmo de ingestión que dictan las escalas grandes, parece poco dependiente del tipo de flujo. En cambio, la forma y tamaño de las escalas grandes, que son en definitiva las determinantes del ritmo de mezcla, son muy dependientes del tipo de flujo (capa límite, chorro o estela). Las escalas grandes o las estructuras coherentes parecen ser, de algún modo, consecuencia de las inestabilidades del flujo.

El descubrimiento de las estructuras coherentes en flujos turbulentos, que no observados con la adecuada resolución temporal aparecen como totalmente caóticos, ha venido a revolucionar nuestras ideas de la turbulencia.

Nuestra capacidad para diseñar adecuadamente los sistemas en que son determinantes

los procesos de combustión está muy ligada a nuestro conocimiento de la estructura de esos procesos. Es cierto que las leyes básicas que los rigen son bien conocidas y, por lo tanto, estaríamos tentados a concluir que estos procesos podrían ser susceptibles de *cálculo*, pero la realidad es que la *observación* experimental es imprescindible, dada la complejidad del sistema de ecuaciones que los determinan y el carácter turbulento de los flujos.

Entre la *observación* y el *cálculo* hay una relación muy estrecha, actuando como vínculo las ideas y conceptos teóricos. Unas veces, las ideas tienen su origen en observaciones de datos experimentales reales o de experimentos virtuales, llevados a cabo mediante simulación numérica. Otras veces, los conceptos teóricos proceden del análisis; éste es el caso de muchos conceptos que surgen al tratar con técnicas asintóticas el problema planteado por la modelización matemática del proceso. Las ideas y conceptos teóricos aportan, por una parte, el punto de vista y el marco apropiado para las observaciones y, por otra parte, facilitan los cálculos y los hacen más eficaces.

Los experimentos cruciales hechos por Reynolds en 1883 para analizar el movimiento en conductos, le llevaron a la idea del tratamiento del flujo en el régimen turbulento utilizando *métodos estadísticos*. Puesto que en los flujos turbulentos encontramos fluctuaciones de tipo caótico de las variables fluidas, tanto espaciales como temporales, parece razonable considerar el flujo turbulento como un proceso estocástico, examinando sus aspectos probabilísticos. La descripción debería hacerse utilizando como base la funcional de densidad de probabilidad conjunta. César Dopazo, hoy en la Universidad de Zaragoza, fué el primero en mostrar cómo pueden utilizarse las ecuaciones de conservación de los flujos reactivos para generar una ecuación lineal en derivadas funcionales que determina esta funcional. No es difícil escribir de un modo formal las soluciones de esta ecuación; sin embargo, la tarea de extraer información de estas soluciones parece casi imposible.

La funcional de densidad de probabilidad determina las funciones de distribución de probabilidad de las variables fluidas y sus valores medios estadísticos de más interés en las aplicaciones, en que basta conocer los valores medios puntuales de las velocidades, temperaturas y concentraciones y las desviaciones estadísticas respecto a los valores medios. Pueden utilizarse las ecuaciones de conservación para obtener, como hizo Reynolds, las ecuaciones (llamadas de Reynolds) que determinarían la distribución espacial de los valores medios. Sin embargo, estas ecuaciones presentan el problema del cierre, por aparecer en ellas los valores medios de los productos de las fluctuaciones que hay que modelar sin guía fiable.

El problema del cierre en los tratamientos estadísticos de los flujos turbulentos parece un obstáculo difícil de salvar desde el punto de vista teórico; de ahí que, aunque las necesidades actuales de cálculo en Ingeniería nos fueren a seguir utilizando los métodos estadísticos (acudiendo a la modelización fenomenológica), se piense también en usar métodos determinísticos para el análisis de los flujos turbulentos. Estos métodos han recibido un gran impulso en las últimas décadas gracias al descubrimiento de las estructuras coherentes, a los avances en la teoría no lineal de estabilidad y al potencial que ofrecen los grandes ordenadores para la simulación

numérica directa. El punto de vista actual es que los flujos turbulentos pueden comprenderse analizando los cambios que experimenta su estructura al crecer el número de Reynolds, desde los valores pequeños correspondientes al flujo laminar hasta los valores altos para los que el flujo turbulento se dice que está plenamente desarrollado.

De esta tarea se ocupa la teoría no lineal de la estabilidad hidrodinámica, apoyándose en análisis lineales de estabilidad. Cuando el parámetro de orden alcanza un valor crítico, el flujo básico deja de ser estable y aparece, por bifurcación de la solución anterior, un nuevo flujo que, cerca del límite de estabilidad, puede describirse utilizando un análisis débilmente no lineal. Este tipo de análisis se ha hecho recientemente para una gran variedad de flujos, muchos de ellos de gran interés en Combustión.

La teoría lineal de estabilidad muestra cómo para valores supercríticos del parámetro de orden (número de Reynolds, por ejemplo) hay modos cuya amplitud crece exponencialmente; la teoría no lineal busca encontrar la ecuación (de tipo Ginzburg-Landau, por ejemplo) que determina la evolución de esta amplitud para tiempos grandes. Landau había hecho la conjetura de que a la turbulencia se llegaba como resultado de una sucesión infinita de bifurcaciones, que iban añadiendo sucesivamente nuevas frecuencias al flujo. Después del trabajo de Lorenz en 1963 y Ruelle y Takens en 1971 se sabe que esta conjetura no es cierta. Una de las vías de transición al movimiento caótico es la de Ruelle y Takens; en ella una primera bifurcación de Hopf convierte un movimiento estacionario en periódico; una segunda introduce una nueva frecuencia y el atractor en el espacio de las fases es un toro de dos dimensiones; la tercera bifurcación da lugar, genéricamente, a un movimiento caótico, que para tiempos grandes termina en un atractor extraño, con una dimensión fractal dada por un número no entero.

Este tipo de respuesta caótica se da en sistemas dinámicos con más de dos grados de libertad, sólo si están regidos por ecuaciones no lineales. El descubrimiento del caos determinista en sistemas dinámicos simples, aunque anticipado por Poincaré e intuitivo por Maxwell, ha sido una de las grandes sorpresas de las dos últimas décadas.

La gran sensibilidad que, para tiempos grandes, tiene la respuesta de los flujos turbulentos ante pequeñas perturbaciones en las condiciones iniciales, era bien conocida y también el horizonte temporal de predictibilidad que introducía esta sensibilidad en el análisis de los flujos reales; lo que ha sido una sorpresa es que el carácter caótico no estaba ligado a los infinitos grados de libertad del movimiento fluido.

Los experimentos que en la década de los 70 pusieron de manifiesto la existencia de estructuras coherentes han introducido ideas estructurales en el análisis de flujos turbulentos; en muchos flujos encontramos estructuras coherentes que tienen una semejanza sorprendente con las que muestran las teorías de estabilidad (El carácter caótico de los flujos parece estar ligado a las fluctuaciones en la fase de las estructuras). Los ordenadores actuales facilitan las técnicas de análisis basadas en la *simulación numérica directa*. Las teorías no lineales de análisis de los atractores de los sistemas dinámicos ofrecen un nuevo marco y punto de vista para interpretar

y organizar la ingente masa de datos aportada por las simulaciones experimentales y numéricas. No es pues aventurado predecir un crecimiento explosivo de nuestro conocimiento de los flujos turbulentos reactivos, gracias a las nuevas técnicas Láser de observación y al potencial de cálculo de los nuevos ordenadores.

Las técnicas de medición con Láser han abierto una nueva vía para el análisis experimental de los procesos de combustión. Sin embargo, estas técnicas no serán eficaces antes de entender los fenómenos de interacción entre la radiación luminosa y las especies reactivas; lo que obliga a desarrollar una teoría de la medida que explique esta interacción.

Los grandes ordenadores actuales permiten la simulación numérica directa de los flujos reactivos. Sin embargo, a las inestabilidades propias de los procesos de combustión se suman a menudo las inestabilidades asociadas a los algoritmos numéricos empleados para tratar estos problemas no lineales; por ello, la solución está siempre supeditada a nuestro buen conocimiento de los problemas matemáticos originales y de los introducidos por los métodos numéricos.

He pretendido, con estas observaciones, resaltar el papel tan importante que tiene la Mecánica de Fluidos en los procesos de combustión. La importancia económica, industrial y ambiental de estos procesos, unido al carácter complejo de los mismos y de los sistemas de ecuaciones no lineales que los gobiernan, ha animado a matemáticos, físicos, químicos e ingenieros a aunar esfuerzos para su análisis.

Yo tuve la fortuna de encontrar, siendo alumno de la Escuela de Ingenieros Aeronáuticos de Madrid, un grupo de profesores, dirigido por D. Gregorio Millán, que me hicieron ver la posibilidad de contribuir desde España a hacer retroceder la frontera de los conocimientos necesarios para la solución urgente de los problemas de la Ingeniería. Me convencieron pronto de la existencia de un orden armonioso en los fenómenos de la naturaleza, representado por leyes que señalan el camino, a través de un aparente laberinto, entre los efectos y las causas.

Yo, siguiendo a mis maestros, me he esforzado y he animado a mis alumnos para que se esfuercen en la búsqueda de explicaciones racionales de los, aparentemente tan complejos, procesos fluidodinámicos y de combustión; tratando, en lo posible, de obtener predicciones útiles para la Ingeniería. Les aseguro que esta tarea es tan fascinante o más que la fascinación antigua del hombre por el fulgor del fuego.

Más que por mis propias aportaciones, ha sido por mi éxito en esta tarea de incentivación por lo que me dirijo a ustedes en estos momentos.